

Министерство образования и науки Российской Федерации

Федеральное бюджетное государственное образовательное учреждение
высшего образования
«Оренбургский государственный университет»

СПЕЦИАЛЬНЫЕ ТЕРМИНЫ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ «ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ МЕТОДЫ В ХИМИИ»

Словарь

Составители:
О. Н. Каныгина,
Е. В. Сальникова,
С. С. Макишева

Рекомендовано к изданию редакционно-издательским советом федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Оренбургский государственный университет» для обучающихся по образовательной программе высшего образования по направлению подготовки 04.03.01 Химия и специальности 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Оренбург
2018

УДК 54:519.6(03)
ББК 24.1я2+22.19я2
С19

Рецензент – доцент, кандидат технических наук Т. Ф. Тарасова

С19 **Специальные термины для самостоятельной работы по дисциплине «Вычислительные методы в химии»** : словарь / составители О. Н. Каныгина, Е. В. Сальникова, С. С. Макишева; Оренбургский гос. ун-т. – Оренбург : ОГУ, 2018.

Словарь содержит 193 термина. Термины сгруппированы по алфавиту. К определениям даны пояснения и примеры, имеются иллюстрации. Для значительной части терминов указана их краткая форма, для некоторых – аббревиатуры. Словарь составлен в соответствии с учетом предложений студентов первого курса; дополнен вопросами для самоподготовки.

Словарь предназначен для самостоятельной работы по дисциплине «Вычислительные методы в химии» обучающихся по направлению подготовки 04.03.01 Химия и специальности 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия.

УДК 54:519.6(03)
ББК 24.1я2+22.19я2

© Каныгина О. Н.,
Сальникова Е. В.,
Макишева С. С., 2018
© ОГУ, 2018

Содержание

Введение	5
1 Глоссарий	6
А	6
Б.....	11
В.....	12
Г.....	16
Д	17
Е.....	21
З.....	21
И	23
К.....	25
Л.....	29
М.....	29
Н	35
О	36
П	37
Р.....	42
С.....	44
Т.....	46
У	47
Ф.....	47
Х	48
Ч.....	50
Э.....	51
2 Вопросы для самостоятельной работы	53
2.1 Вопросы к первому рубежному контролю	53

2.2 Вопросы ко второму рубежному контролю	54
Список использованных источников	57

Введение

Терминологический словарь по дисциплине «Вычислительные методы в химии», предназначенный для самостоятельной работы студентов, обучающихся по направлению подготовки Химия и специальности Фундаментальная и прикладная химия, состоит из двух частей. Первая представляет собой глоссарий, а вторая – блок вопросов, способствующих организации работы со специальной литературой.

Что такое глоссарий? Глоссарий (лат. glossarium – «собрание глосс») – словарь узкоспециализированных терминов в какой-либо отрасли знаний с толкованием, иногда переводом на другой язык, комментариями и примерами.

В рекомендуемом глоссарии собраны термины, понятия и определения, используемые при изучении дисциплины «Вычислительные методы в химии». Большая часть терминов визуализирована с помощью иллюстраций.

Глоссарий составлен на основе субъективных «незнаний», в процессе прослушивания курса лекций, чтения статей, при подготовке к семинарам; обучающиеся отмечают незнакомые, непонятные слова и находят их значения в методических указаниях. В нескольких случаях указано несколько вариантов определения терминов, отобраны те из них, которые авторы посчитали наиболее точными и необходимыми в рамках изучаемой дисциплины.

В представляемом глоссарии важные для обучения термины определены группой студентов первого курса из 6 человек при изучении дисциплины «Вычислительные методы в химии». Процесс составления специализированного словаря являлся для них неотъемлемой частью процесса обучения, получения и закрепления знаний, развитием способности к систематизации и накоплению научных знаний.

Глоссарий включает 193 термина, расположенных в алфавитном порядке. В конце методических указаний приведены вопросы для самостоятельной работы обучающихся, список полезной литературы и перечень периодических изданий.

1 Глоссарий

А

Абляция – процесс удаления вещества с поверхности твердого тела под действием излучения или обтекающего потока горячего газа.



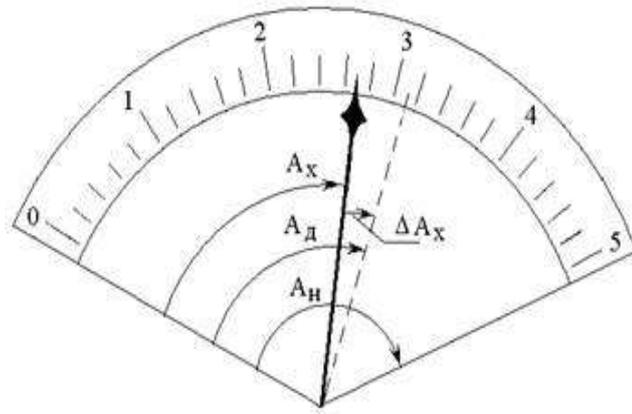
Абсолютное измерение – измерение, основанное на прямых измерениях одной или нескольких основных величин и (или) использовании значений физических констант.

Абсолютная погрешность функции равна произведению абсолютной погрешности аргумента на абсолютную величину производной:

$$\varepsilon_u = |f'(\alpha)| \cdot \varepsilon_\alpha$$

Абсолютная погрешность приближенного числа (x) – это абсолютная величина разности между истинным и приближенным значением.

$$\Delta x = |x^* - x|$$



Агломерация – пространственная группировка и адгезия дисперсных частиц, в результате которой образуются более крупные по размерам вторичные частицы.



Аккредитованная аналитическая лаборатория (центр) – аналитическая лаборатория (центр), получившая в результате ее проверки органом по аккредитации аттестат аккредитации, подтверждающий ее компетентность в выполнении аналитических работ, вошедших в область ее аккредитации.

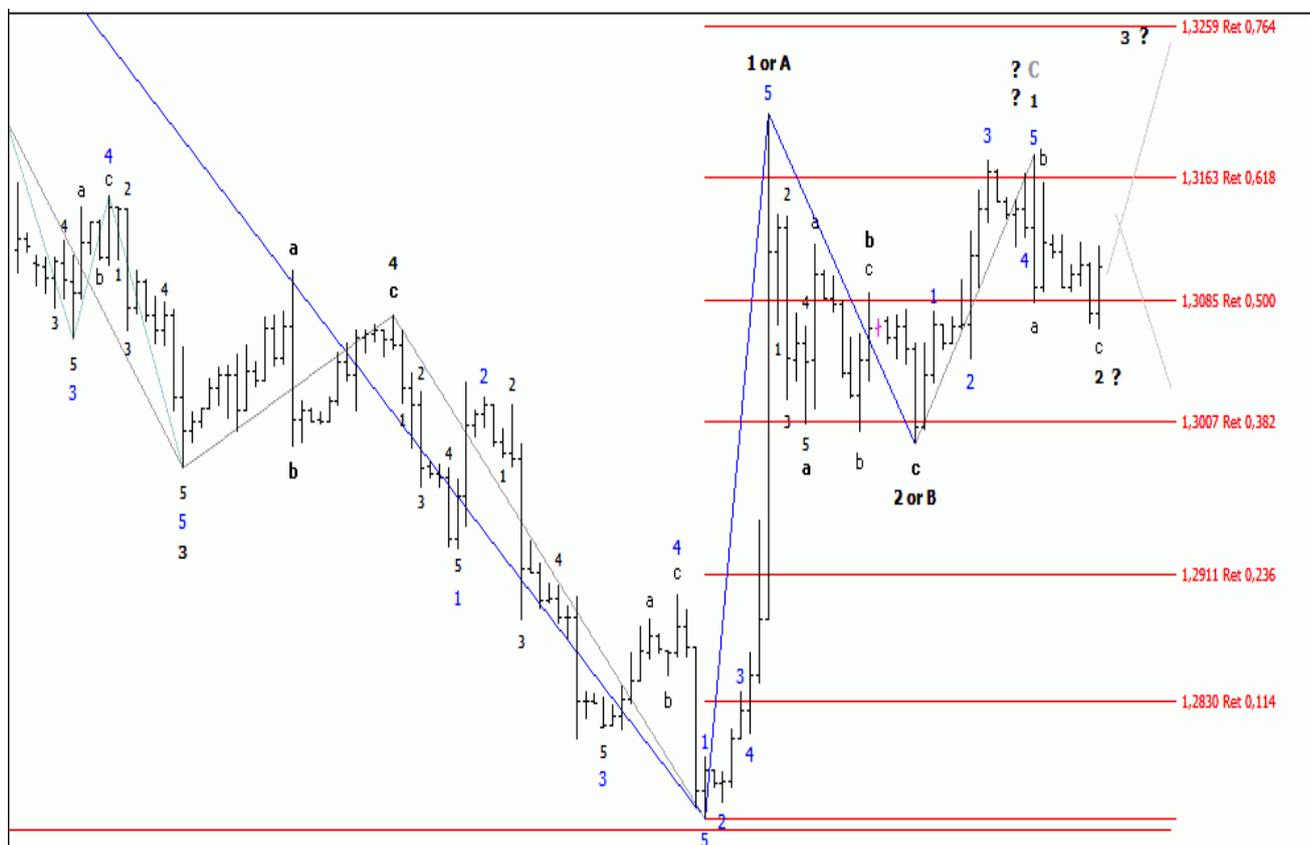


Алгебраические уравнения – уравнения вида $f_n(x) = 0$, где $f_n(x)$ – многочлен одной переменной. Например,

$$P(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \text{ or } P(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0$$

где $P(x_1, x_2, \dots, x_n)$ – многочлен от переменных x , которые называются неизвестными.

Анализ свертки данных – это основанный на линейном программировании метод измерения сравнительной эффективности организационных единиц в ситуациях, когда из-за множества используемых переменных «входа» и многомерности получаемого результата, описываемого набором переменных «выхода», их сопоставление оказывается затруднительным.



Анализ стандартного образца – это общепринятый прием оценивания правильности метода или методики анализа.

Аналит – компонент, искомый или определяемый в пробе. Качественный анализ – экспериментальное установление факта наличия или отсутствия аналита в пробе при заданном пороговом значении его содержания. Это определение указывает на то, что при выдаче результата качественного анализа необходимо указывать предел обнаружения аналита.



Аналитическая химия – это раздел химической науки, разрабатывающий на основе фундаментальных законов химии и физики принципиальные методы и приемы качественного и количественного анализа атомного, молекулярного и фазового состава вещества.

Аналитический контроль – оценивание соответствия объекта установленным требованиям, опирающееся на результаты аналитических работ.

Аналитические признаки – это свойства анализируемого вещества или продуктов его превращения, которые позволяют судить о наличии в нём тех или иных компонентов. Характерные аналитические признаки – цвет, запах, угол вращения плоскости поляризации света, радиоактивность, способность к взаимодействию с электромагнитным излучением и другие (визуально наблюдаемое, инструментально фиксируемое изменение свойств веществ, вступающих в аналитические реакции).

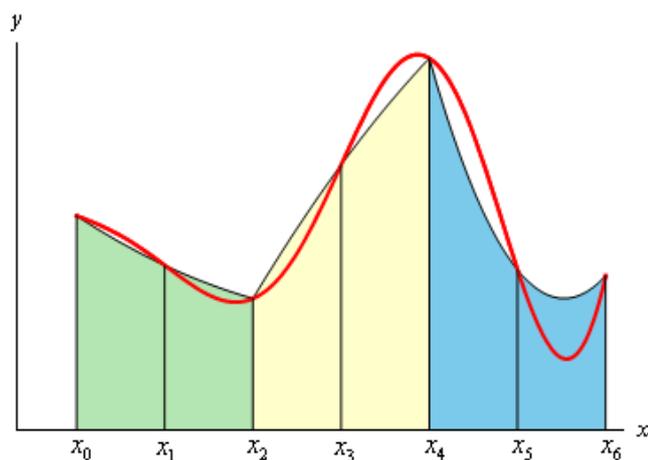
Аналитическая реакция – это химическая реакция, в процессе которой анализируемое вещество при взаимодействии с аналитическим реагентом образует продукт с заметными аналитическими признаками.

Аналитический сигнал – это физическая величина, функционально связанная с содержанием аналита, и регистрируемая в ходе выполнения методики анализа.



АС – это смесь двух и более веществ, приготовленная по документированной методике, с установленными в результате аттестации по расчетно-экспериментальной процедуре приготовления значениями величин, характеризующих состав смеси.

Аппроксимация (приближение) – научный метод, состоящий в замене одних объектов другими, в каком-то смысле близкими к исходным, но более простыми. Аппроксимация позволяет исследовать числовые характеристики и качественные свойства объекта, сводя задачу к изучению более простых и удобных объектов (например, таких, характеристики которых легко вычисляются или свойства которых уже известны).



Здесь $y = f(x)$ - функция аргумента x , значения которого $x_1, x_2 \dots x_6$ – показаны на оси X . Если функция задана в табличном виде и требуется найти некоторую аналитическую функцию, то находят некоторую функцию $f(x)$, такую, чтобы отклонения ее от заданной табличной функции было наименьшим. Функция $f(x)$ (красная линия) называется аппроксимирующей. Вид аппроксимирующей функции существенным образом зависит от исходной табличной функции. В зависимости от исходных данных функцию $f(x)$ выбирают в виде экспоненциальной, логарифмической, степенной, синусоидальной, полиномиальной и так далее. В каждом конкретном случае её выбирают таким образом, чтобы достичь максимальной близости аппроксимирующей и табличной функций.

Б

Безупречный эксперимент – невыполнимая на практике модель эксперимента, используемая психологами-экспериментаторами в качестве эталона.

Библиотека химических соединений (комбинаторная библиотека) – это библиотеки, представляющие собой коллекции химических соединений, которые могут существовать в виде смеси, в том числе в растворе или в виде набора, в котором соединения пространственно разделены и, возможно, присоединены к твердой подложке (матрица).

В

Вероятность – количественная мера возможности осуществления события при наличии неопределенности, то есть в ситуации, когда это событие характеризуется как возможное.



Вещество – вид материи, который, в отличие от физического поля, обладает массой покоя. В конечном счете, вещество складывается из элементарных частиц, масса покоя которых не равна нулю (в основном из элементов, протонов и нейтронов). В классической физике вещество и поле противопоставлялись друг другу как два вида материи, у первого из которых структура дискретна, а у второго – непрерывна. Квантовая физика, внедрившая идею двойственной корпускулярно-волновой природы любого микрообъекта, привела к нивелированию этого представления. Выявление тесной взаимосвязи вещества и поля привело к углублению представлений о структуре материи. На этой основе были строго разграничены понятия вещества и материи, отождествлявшиеся в науке на протяжении многих веков.

- вещество (в химии) – физическая субстанция со специфическим химическим составом.

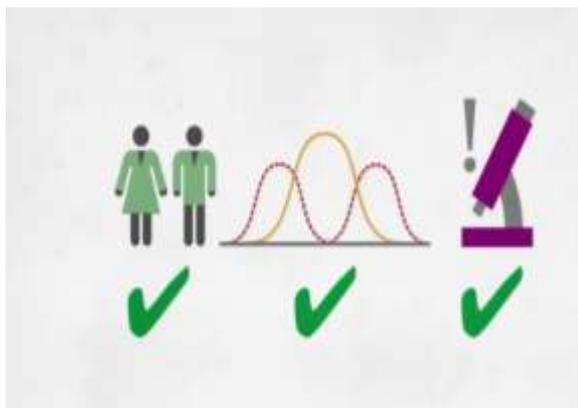
- вещество (в физике) – форма материи, в отличие от поля обладающая массой покоя. Вещество состоит из частиц, среди которых чаще всего встречаются

электроны, протоны и нейтроны. Последние два образуют атомные ядра, а все вместе – атомы (атомное вещество), из которых – молекулы, кристаллы и так далее.

- вещество в (биологии) – материя, образующая ткани организмов, входящая в состав органелл клеток.

Визуализация – 1) представление физического процесса или явления в форме, удобной для зрительного восприятия; 2) методы преобразования невидимого для человеческого глаза поля излучения (инфракрасного, ультрафиолетового, рентгеновского, ультразвукового и другого) в видимое (черно-белое или цветное) изображение излучающего объекта.

Воспроизводимость – характеристика результатов испытаний, определяемая взаимной близостью результатов повторных испытаний объекта.

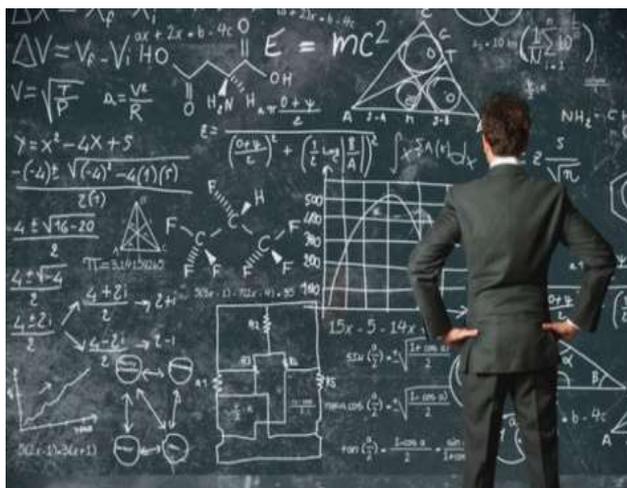


Выборка или выборочная совокупность – часть генеральной совокупности элементов, которая охватывается экспериментом (наблюдением, опросом).

Вычислительной мощностью называется число операций за единицу времени.



Вычислительная сложность – это алгоритм функции, описывающей время исполнения алгоритма в зависимости от размера системы. В зависимости от механизма расчета потенциала молекулярной системы методы делятся на: abinitio, полуэмпирические, механические атомистические, механические корс–грейн (объединено - атомные) и комбинированные.

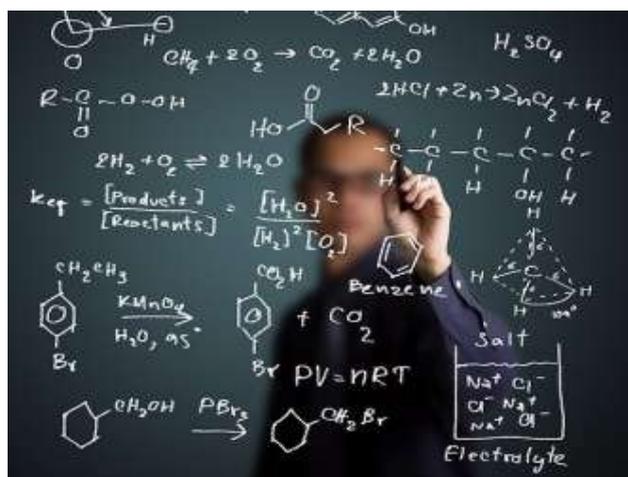


Вычислительная стоимость – это алгоритм количества операций, которое требуется для его завершения. Стоимость обычно выражают в процессоро – часах (количество процессоров · количество часов).



Вычислительные (численные) методы – методы решения математических задач в численном виде; представление как исходных данных в задаче, так и её решения – в виде числа или набора чисел. Многие численные методы являются частью библиотек математических программ.

Вычислительная химия – это раздел химии, в котором математические методы используются для расчета молекулярных свойств, моделирования поведения молекул, планирования синтеза, поиска в базах данных и обработки комбинаторных библиотек.



Г

Генеральная выборка включает все возможные значения измеряемой величины, и добавить большие туда нельзя.

Генеральная совокупность – это все абстрактно мыслимое количество случайных величин (от $-\infty$ до $+\infty$).



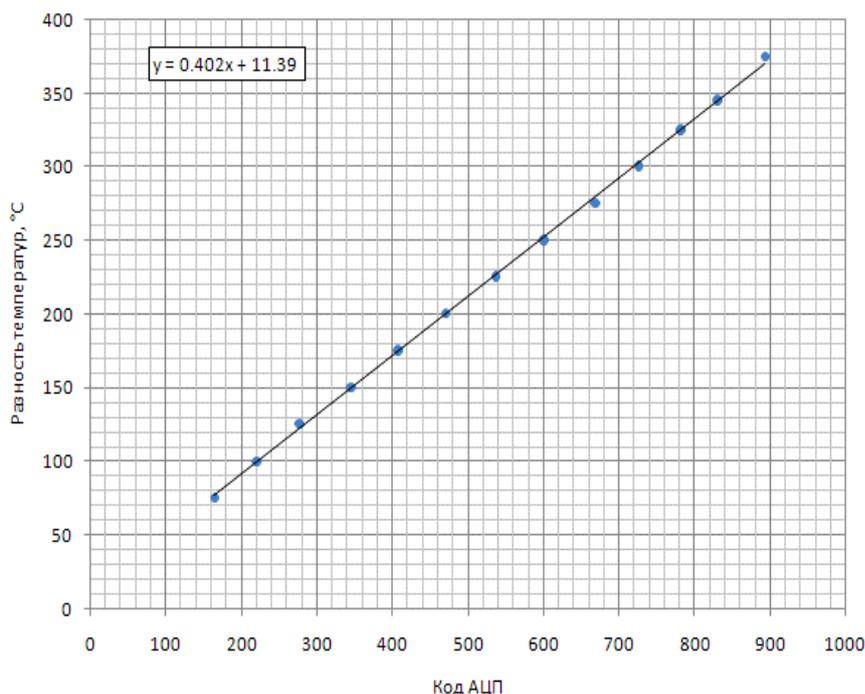
Гистограмма в статистике – это геометрическое изображение эмпирической функции плотности вероятности некоторой случайной величины.

Глобализация – процесс всемирной экономической, политической, культурной и религиозной интеграции и унификации.

Глоссарий (лат. *glossarium* – «собрание глосс») – словарь узкоспециализированных терминов какой-либо отрасли знаний с толкованием, иногда переводом на другой язык, комментариями и примерами.

Градуировочный образец – образец сравнения (или набор таких образцов), используемый для получения градуировочной характеристики.

Градуировочная характеристика – это зависимость аналитического сигнала от содержания аналита, выраженная в виде формулы (градуировочная функция), графика (градуировочный график) или таблицы. Пример – градуировочный график термодпары.



Д

Действительное значение – это экспериментально полученное или рассчитанное значение, которое настолько близко к истинному, что может быть использовано вместо него.

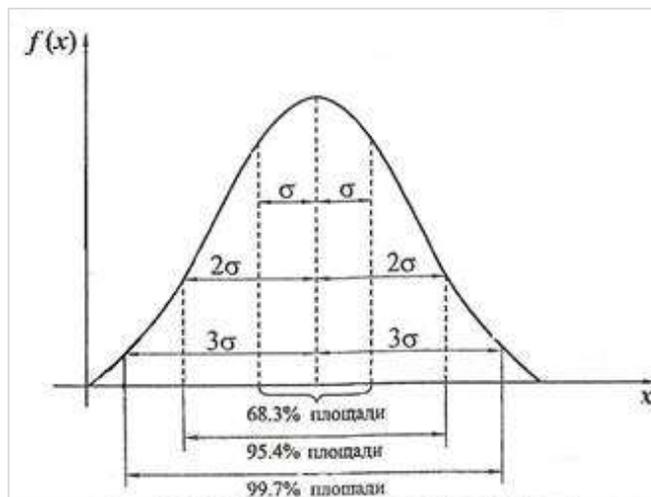
Диаграмма – графическое представление данных, позволяющее быстро оценить соотношение нескольких величин. Представляет собой геометрическое символическое изображение информации с применением различных приёмов техники визуализации.



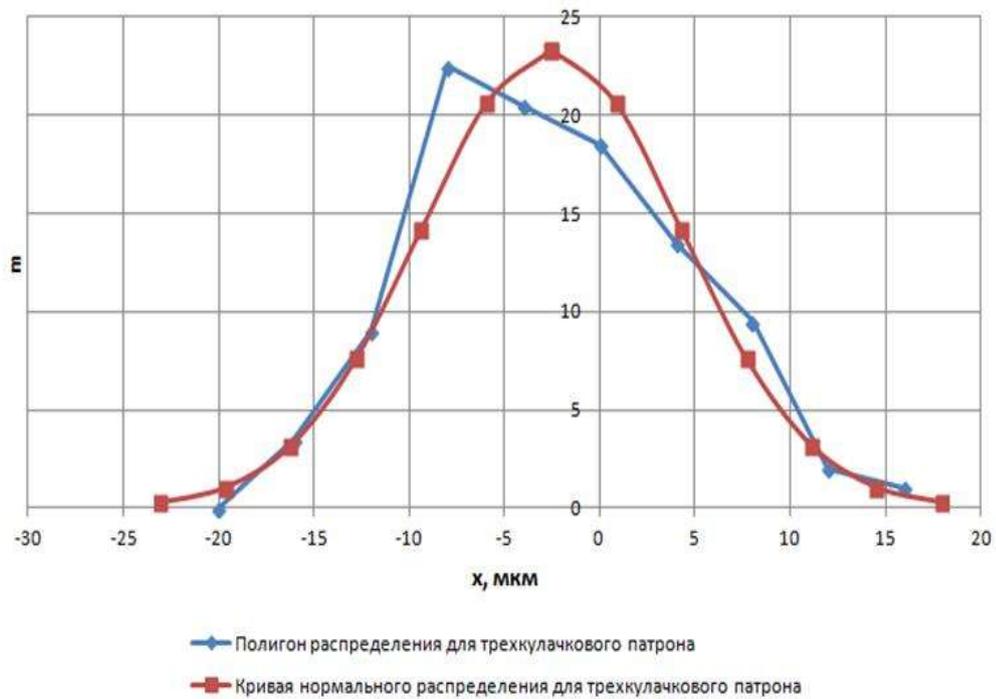
Динамические методы претендуют на имитацию «жизни» молекул в небольшом объеме на небольших временах. Объем описываемых систем и внутреннее время моделирования зависят от уровня приближения и вычислительной мощности. Расчеты динамическими методами часто называют «вычислительный эксперимент» или «эксперимент *in silico*».



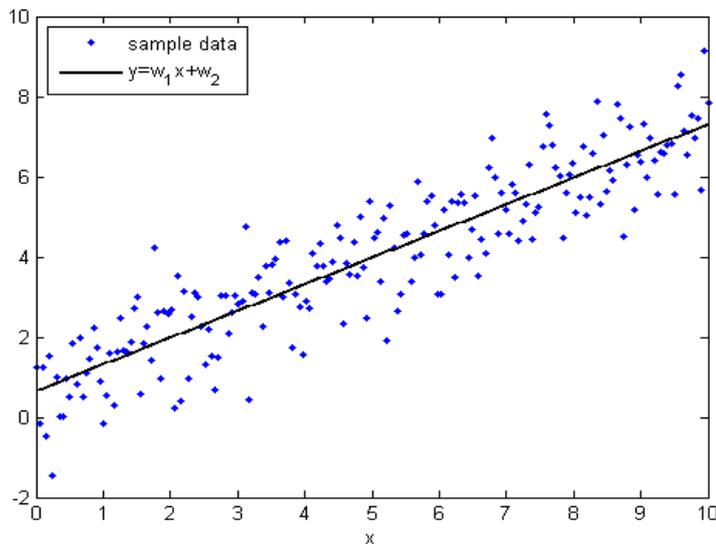
Дисперсия (σ) – мера разброса случайной величины, то есть её отклонения от математического ожидания. В статистике для обозначения дисперсии часто употребляется «квадратный корень из дисперсии» и называется стандартным отклонением. Стандартное отклонение измеряется в тех же единицах, что и сама случайная величина, а дисперсия измеряется в квадратах этой единицы измерения.



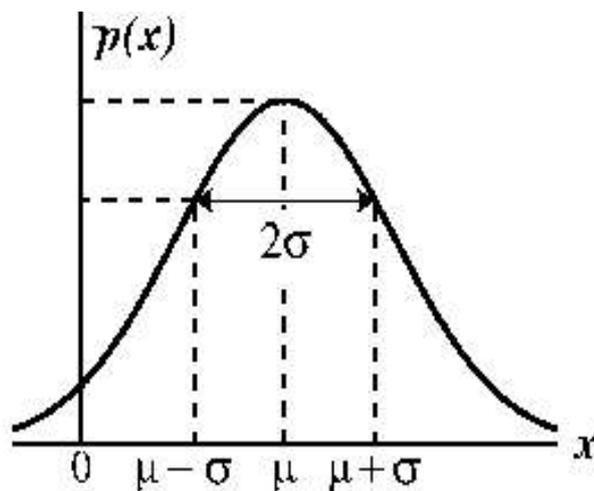
Дисперсия выборки – характеризует рассеяние результатов относительно среднего значения.



Дисперсия линии регрессии – рассеяние экспериментальных точек относительно прямой.



Дисперсия случайной величины – мера разброса значений случайной величины относительно её математического ожидания.



Диссипация – (лат. dissipatio – рассеяние) – рассеяние; (в физике диссипация энергии) – переход энергии упорядоченного движения в энергию хаотического движения (теплоту);

– процесс обмена системы со средой веществом, энергией и информацией, представляющий собой «переструктурирование чужого в свое и рассеивание лишнего» (Котельников Г.А.). Диссипативные процессы характеризуют открытые нелинейные системы, где происходит увеличение неоднородностей. При этом диссипативные процессы «ведут не к равновесию, но к

формированию диссипативных структур, тождественных процессам, которые из-за взаимной компенсации приводят к равновесию» (Пригожин И.Р).

Доверительной вероятностью (достоверностью) измерения – называется вероятность того, что истинное значение измеряемой величины попадает в данный доверительный интервал, то есть в зону $a \leq x_d \leq b$. Эта величина определяется в долях единицы или в процентах.

Доверительным называют **интервал**, который покрывает неизвестный параметр с заданной надёжностью.

Е

Единичное определение – однократное проведение всей последовательности операций, предусмотренных методикой анализа вещества.

Единица физической величины – фиксированная физическая величина, которой условно по соглашению присвоено числовое значение, равное 1. С единицей физической величины можно сравнить любую другую величину того же рода и выразить их отношение в виде числа. Применяется для количественного выражения однородных с ней физических величин.

З

Зависимость (в математике) – соответствие между элементами двух множеств, при котором каждому элементу одного множества ставится в соответствие элемент из другого множества.

Зависимая переменная – в научном эксперименте измеряемая переменная, изменения которой связывают с изменениями независимой переменной.

Задача – проблемная ситуация с явно заданной целью, которую необходимо достичь; в более узком смысле задачей также называют саму эту цель, данную в рамках проблемной ситуации, то есть то, что требуется сделать.

Задача оптимизации – это аппроксимация экспериментальных данных функции с целью поиска точек минимального и максимального.

Закон – если между возможными значениями случайной величины x и плотностью вероятности их появления можно установить определенное математическое соотношение.



Значение – определение объекта, субъекта, отражающее всю его ценность и характеристики. У слов различают лексическое значение – соотнесенность звуковой оболочки слова с соответствующими предметами или явлениями объективной действительности, и грамматическое значение – значение, выражаемое словоизменяющей морфемой (грамматическим показателем).

Значение физической величины – выражение размера физической величины в виде некоторого числа принятых для нее единиц, абсолютных или относительных. В аналитической химии такими единицами являются единицы массы (килограмм, грамм и так далее), проценты, плотность, г/дм^3 и так далее.

Значащие цифры - это все цифры, кроме нуля, а также и нуль в том случае, если он стоит между другими значащими цифрами.

И

Идентификация – установление тождественности неизвестного объекта известному на основании совпадения признаков.

Измерения – совокупность операций для определения отношения измеряемой величины к другой однородной величине, принятой за единицу. Измерение физической величины опытным путём проводится с помощью различных средств измерений и включает в себя 2 этапа:

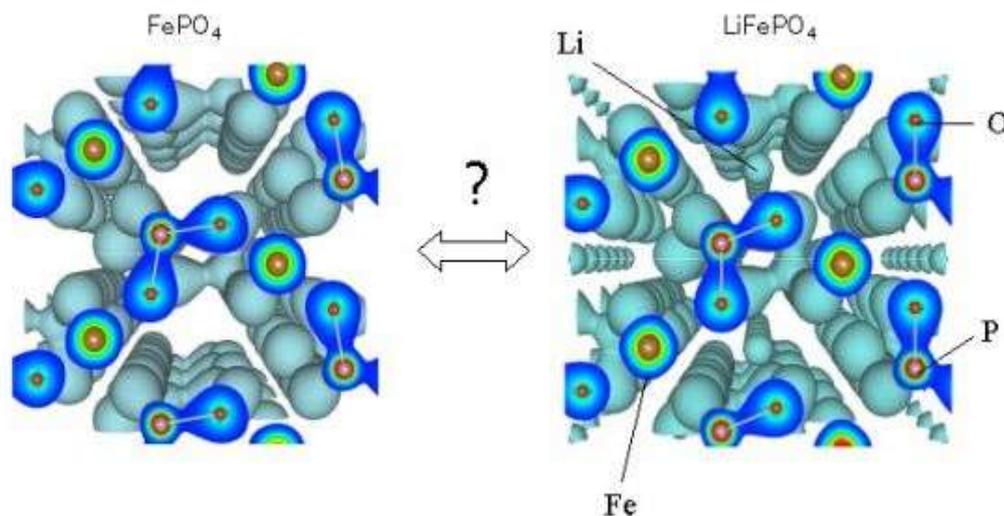
- 1) сравнение измеряемой величины с единицей;
- 2) преобразование в форму, удобную для использования.



Изомеры – химические соединения, одинаковые по молекулярной массе и составу, но различающиеся по строению.

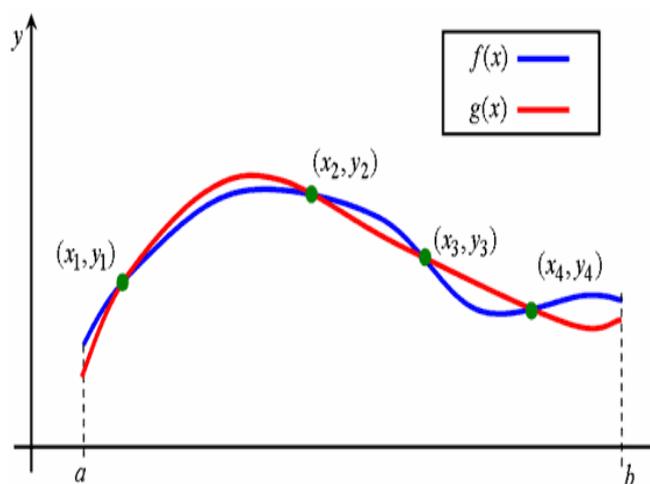
Инструментальные приборные погрешности – погрешности, которые определяются погрешностями применяемых средств измерений и вызываются несовершенством принципа действия, неточностью градуировки шкалы, не наглядностью прибора.

Интеркаляция – обратимое внедрение молекул ионов или атомов между молекулами или группами атомов другого типа.



Интеркаляция лития в структуру фосфата железа

Интерполяция (линия $g(x)$) – это метод нахождения промежуточных значений некоторой величины по известному дискретному значению.



Интерпретация – истолкование, разъяснение смысла какой-либо знаковой системы (символа, выражения, текста).

Информация – (от лат informatio – ознакомление, разъяснение, представление, понятие) – сообщение, осведомление о положении дел, сведения о чём-либо, передаваемые людьми; уменьшаемая, снимаемая неопределённость в

результате получения сообщений; сообщение, неразрывно связанное с управлением, сигналы в единстве синтаксических, семантических и прагматических характеристик; передача, отражение разнообразия в любых объектах и процессах (неживой и живой природы).

Истинное значение физической величины – это значение, идеально отражающее свойства объекта как количественно, так и качественно. Оно является той абсолютной истиной, к которой стремятся, пытаясь выразить ее числовым значением.

К

Качественный анализ – это совокупность химических, физических и физико-химических методов исследования пробы, позволяющих установить органическую или неорганическую природу анализируемого вещества и его элементов и молекулярный состав.

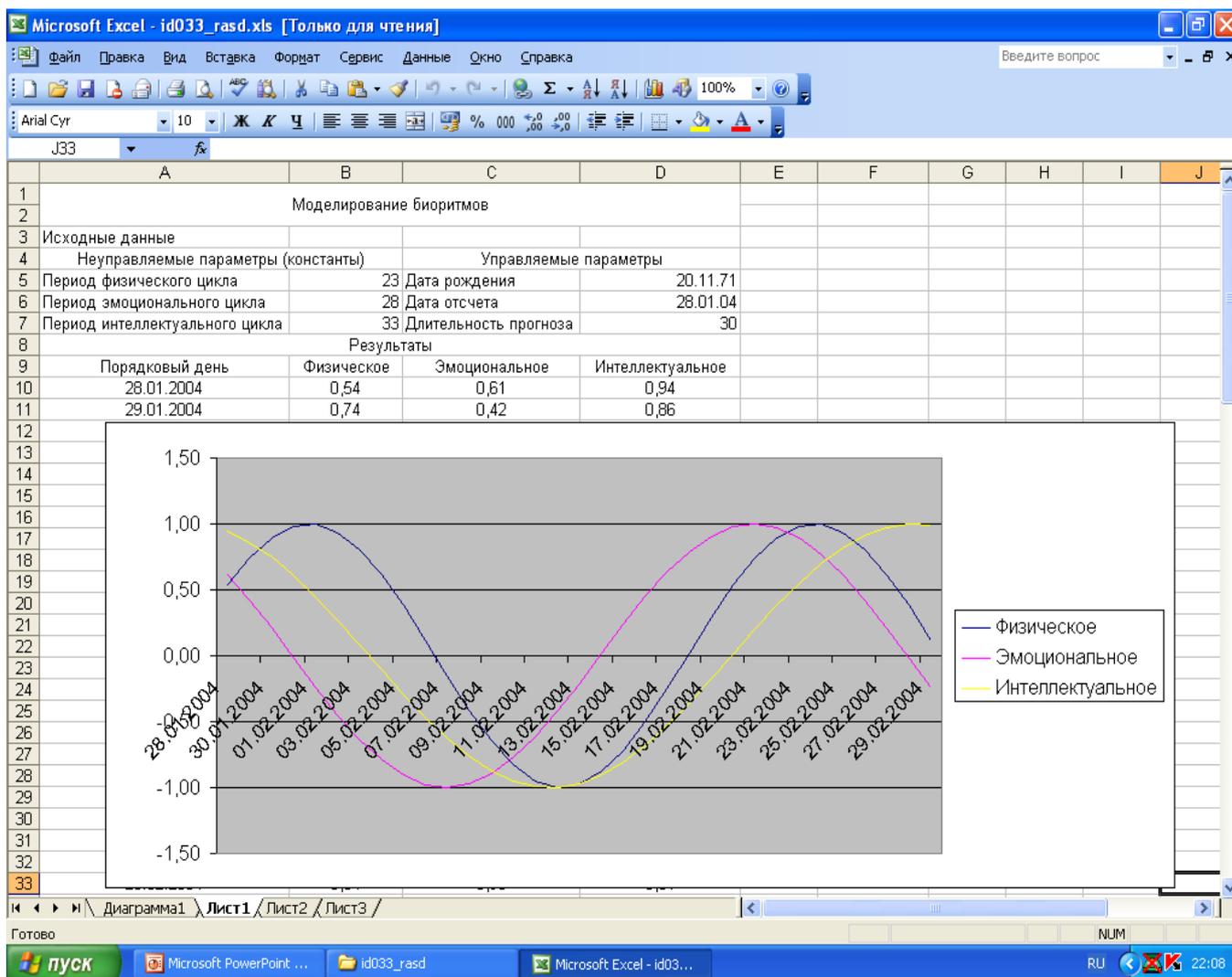


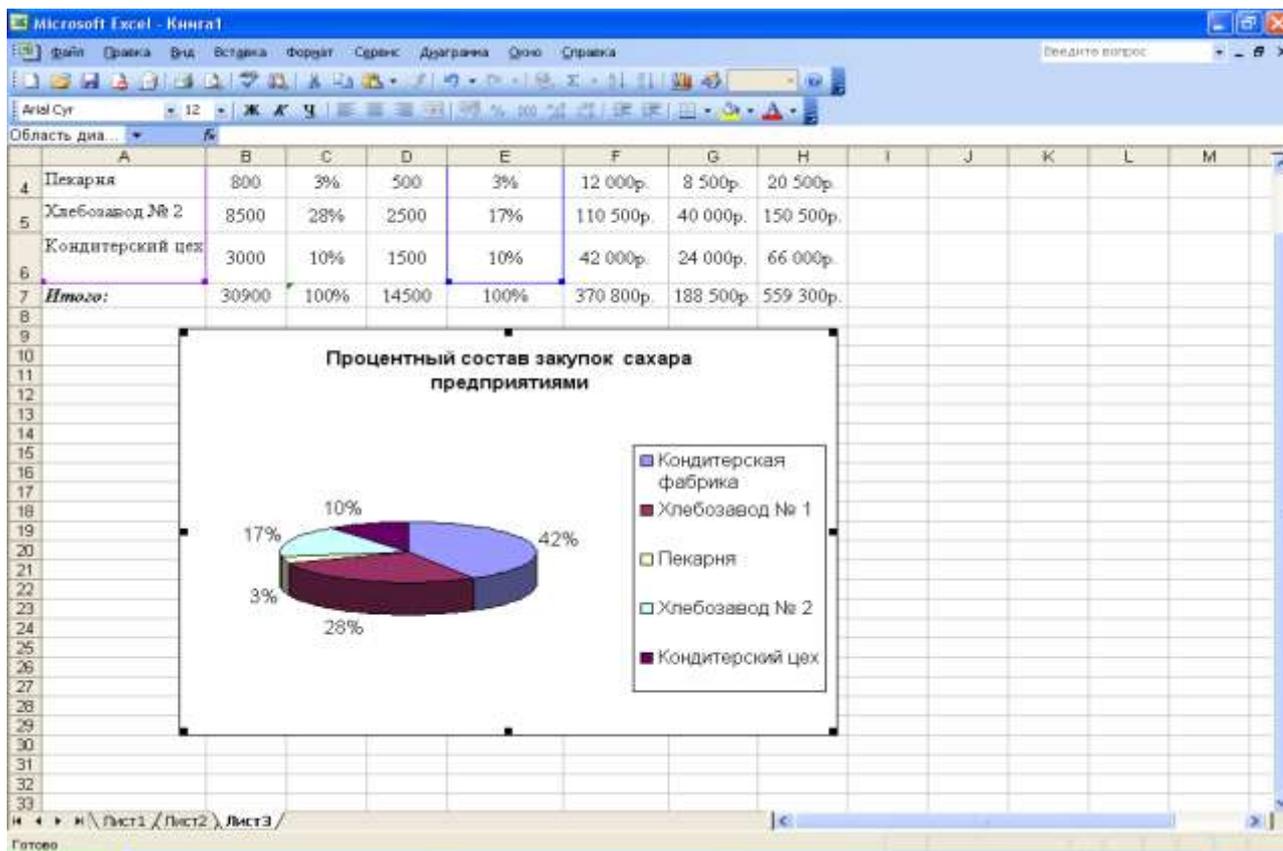
Кинетика – это наука о скоростях процессов. Химическая кинетика рассматривает скорости и механизм химических реакций. Важнейший параметр кинетики – время протекания процесса.

Количественный анализ – совокупность химических, физико-химических и физических методов определения количественного соотношения компонентов, входящих в состав анализируемого вещества.

Количество вещества – физическая величина, характеризующая количество однотипных структурных единиц, содержащихся в веществе. Под структурными единицами понимаются любые частицы, из которых состоит вещество (атомы, молекулы, ионы, электроны или любые другие частицы).

Компьютерные технологии или информационные технологии (ИТ) – это обобщенное название технологий, отвечающих за хранение, передачу, обработку, защиту и воспроизведение информации с использованием компьютеров.





Контрольный опыт – проведение пробы, не содержащей определяемого компонента, через все стадии анализа.



Косвенные измерения – это такие измерения, результат которых определяется не в ходе прямого эксперимента, а путем вычисления с помощью конкретных функциональных зависимостей, аргументами которых выступают результаты тех или других прямых измерений.

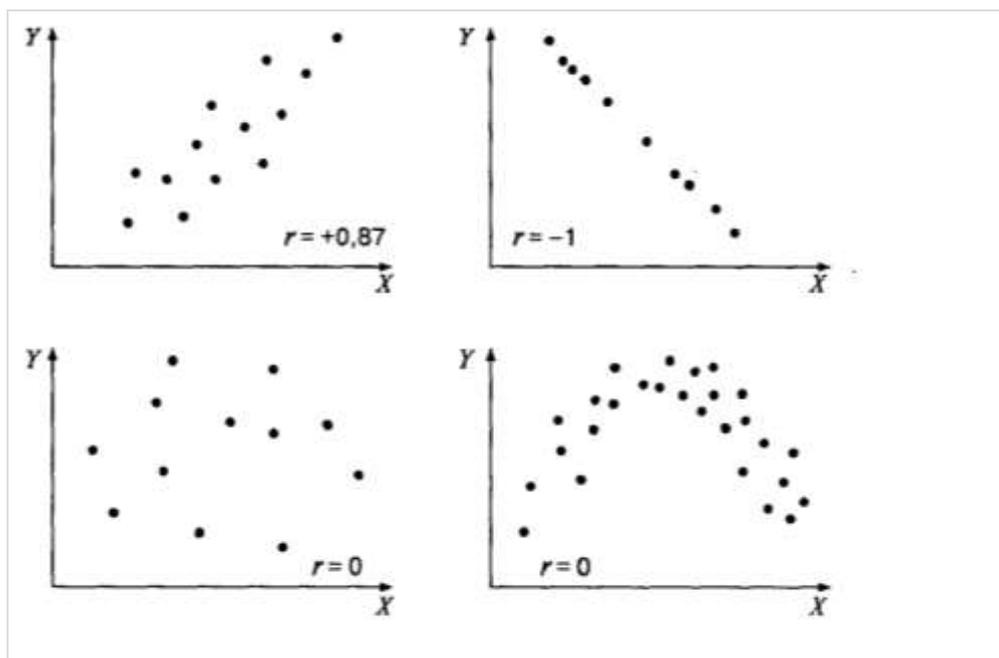
Коэффициент вариации – наиболее универсальный показатель, отражающий степень разбросанности значений независимо от их масштаба и единиц измерения.

Коэффициент корреляции – это статистическая взаимосвязь двух или более случайных величин (либо величин, которые можно с некоторой допустимой степенью точности считать таковыми).

Коэффициент корреляции Пирсона вычисляется по формуле:

$$r = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{X})(y_i - \bar{Y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{X})^2 \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{Y})^2}}$$

где x_i - значения переменной X , y_i - значения переменной Y ,
 \bar{X} - среднее выборочное по X , \bar{Y} - среднее выборочное по Y .



Предельные значения коэффициентов корреляции

Критерий (др. греч. κριτήριον – способность различения, средство суждения, мерило) – признак, основание, правило принятия решения по оценке чего-либо на соответствие предъявленным требованиям. Различают логические (формальные) и эмпирические (экспериментальные) критерии истинности. Формальным критерием

истины служат логические законы: истинно всё, что не включает в себе противоречия, логически правильно. Эмпирическим критерием истинности служит соответствие знаний экспериментальным данным, например: «критерий пригодности объекта», «критерий достоверности результатов», «критерий достаточности испытаний». Вопросом о критериях истины, выставляемых разными философскими школами, занимается теория познания или гносеология.

Критерий Фишера (F-критерий, F^* - критерий) – статистический критерий, тестовая статистика которого при выполнении нулевой гипотезы имеет распределение Фишера (F-распределение).

U-Критерий Манна – Уитни (англ. Mann – Whitney U-test) – статистический критерий, используемый для оценки различий между двумя независимыми выборками по уровню какого-либо признака, измеренного количественно. Позволяет выявлять различия в значении параметра между малыми выборками.

Л

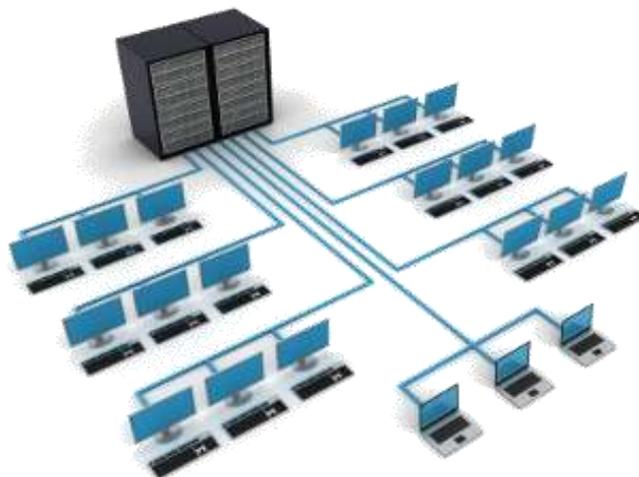
Линейные уравнения – уравнение вида $a \cdot x = b$, где x – переменная, a и b – некоторые числа, называется линейным уравнением с одной переменной.

М

Масса – величина, определяющая инерционные и гравитационные свойства тела в ситуациях, когда его скорость намного меньше скорости света.

Масштабируемость – это свойство параллельного алгоритма работать быстрее на большем количестве ядер. Непараллельный алгоритм этим свойством не обладает. Ситуация, когда повышение количества ядер вдвое приводит к

сокращению времени исполнения вдвое, называется идеальным масштабированием, к которому все стремятся.



Математическое ожидание – (для генеральной совокупности) среднее значение случайной величины (распределение вероятностей случайной величины, рассматривается в теории вероятностей.) Математическое ожидание случайной величины X определяется интегрированием по формуле:

$$M(X) = \int_{-\infty}^{\infty} xf(x)dx$$



Математические описание модели – представляет с собой совокупность уравнений, учитывающих конструктивные и режимные параметры процессов.

Матрицы – это математический объект, записываемый в виде прямоугольной таблицы элементов кольца или поля (например, целых, действительных или комплексных чисел), которая представляет собой совокупность строк и столбцов, на пересечении которых находятся её элементы.

Межлабораторные сравнительные испытания (МСИ) – проведение испытаний и оценка результатов испытаний на одних и тех же или идентичных образцах двумя или более лабораториями в соответствии с предварительно заданными условиями.



Метод анализа – способ получения информации о химическом составе вещества на основе одного или нескольких принципов.

Метод аналитического выравнивания заключается в построении уравнения регрессии, характеризующего зависимость уровней ряда от временной переменной.

Методика аналитического контроля – документированная совокупность операций и правил проведения аналитического контроля конкретных объектов. Она включает методики отбора и подготовки проб, методику анализа, правила приемки и тому подобное.



Метод Гаусса – классический метод решения системы алгебраических уравнений (СЛАУ). Это метод последовательного исключения переменных, когда с помощью элементарных преобразований система уравнений приводится к равносильной системе треугольного вида, из которой последовательно, начиная с последних (по номеру), находят все переменные системы.

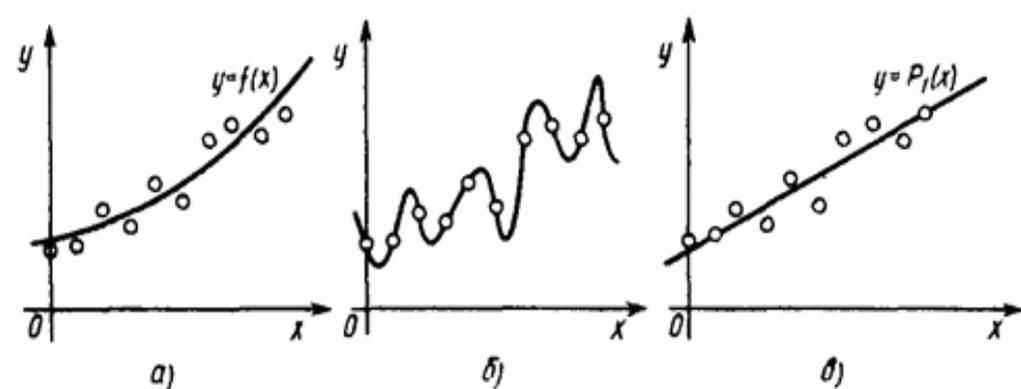
Метод градуировочного графика – это графический приём нахождения неизвестной концентрации (C_x) по величине аналитического сигнала пробы (I_x).



Метод измерений – приём или совокупность приёмов сравнения измеряемой физической величины с её единицей в соответствии с реализованным принципом измерений. Метод измерений обычно обусловлен устройством средств измерений.

Математическая статистика – наука, разрабатывающая математические методы систематизации и использования статистических данных для научных и практических выводов. Она опирается на теоретические вероятности и на использование результата опыта для изучения объективных закономерностей исследовательских явлений.

Метод наименьших квадратов (МНК) – математический метод, применяемый для решения различных задач, основанный на минимизации суммы квадратов отклонений некоторых функций от искомых переменных.



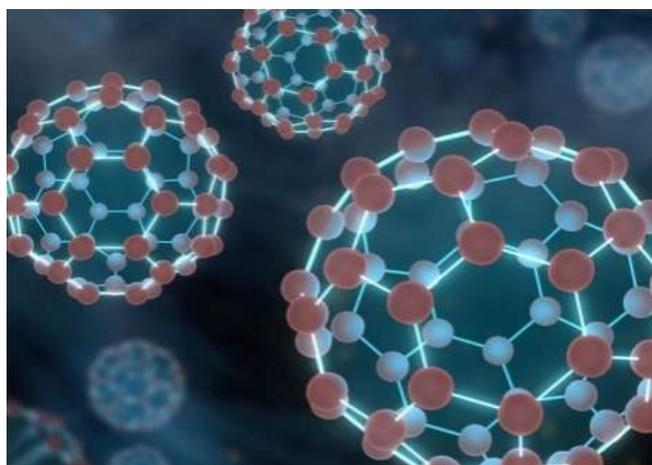
Методика анализа (или методика выполнения измерений (МВИ)) – документированная совокупность операций и правил, выполнение которых обеспечивает получение результата анализа вещества с установленными характеристиками погрешности (неопределенностью) или – для методик качественного анализа – установленной достоверностью.

Методические погрешности – погрешности, обусловленные несовершенством метода, а также упрощениями, положенными в основу методики.

Метрология – наука об измерениях, методах и средствах обеспечения их единства и способах достижения требуемой точности. Ее разделами являются: метрология теоретическая, законодательная и практическая. Первый занимается разработкой фундаментальных основ метрологии. Предметом второго раздела

является создание законодательной базы, направленной на обеспечение единства и необходимой точности измерений. Третий раздел решает вопросы практического применения разработок первых двух разделов. Реализации последнего раздела метрологии в области аналитической химии осуществляется с использованием математической статистики.

Механические корс-грейн – это те же механические расчеты, но для снижения вычислительной стоимости атомы объединяются в группы, и материальная точка имитирует уже группу атомов.



Механические методы расчета – атомы заменяются материальными точками с парциальными зарядами, а потенциальная энергия заменяется набором 2-х, 3-х 4-х центровых членов, имитирующих различные механические упругие элементы – пружины, пружинные педали, винтовые пружины.

Многократное измерение – измерение физической величины одного и того же размера, результат которого получен из нескольких следующих друг за другом измерений, то есть состоящее из ряда однократных измерений.

Мода – это наиболее часто встречающееся значение варьирующего признака в вариационном ряду. Модой распределения называется такая величина изучаемого

признака, которая в данной совокупности встречается наиболее часто, то есть один из вариантов признака повторяется чаще, чем все другие.

Молекула – электрически нейтральная частица, образованная из двух или более атомов.

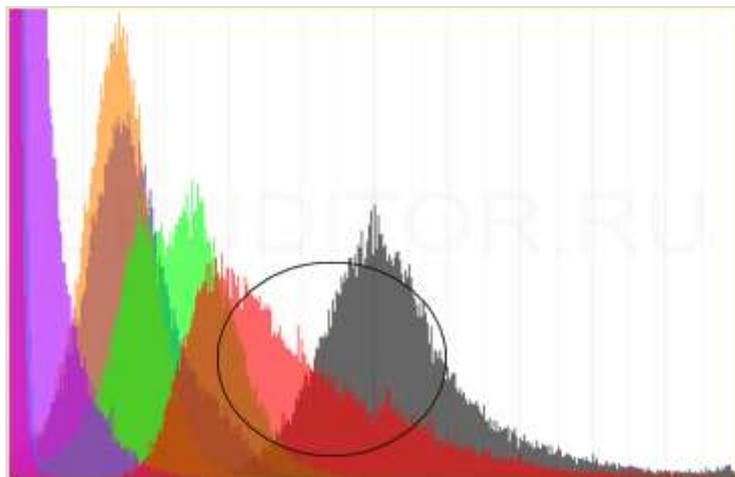
Н

Наблюдение – целенаправленное восприятие химических объектов с целью их изучения.

Независимая переменная – в научном эксперименте переменная, которая намеренно варьируется экспериментатором с целью выяснить ее влияние на зависимую переменную.

Независимые результаты измерений – результаты измерений, не содержащие статистических погрешностей.

Нормальные распределения – распределения вероятностей, которые в одномерном случае задаются функцией плотности вероятности, совпадающей с функцией Гаусса.



Нормы точности результатов анализа – характеристики точности (правильности и прецизионности) или погрешности результатов анализа, задаваемые в качестве допускаемых.

О

Общее значение – распространение выводов, полученных из наблюдения над одной частью явления, на другую его часть.

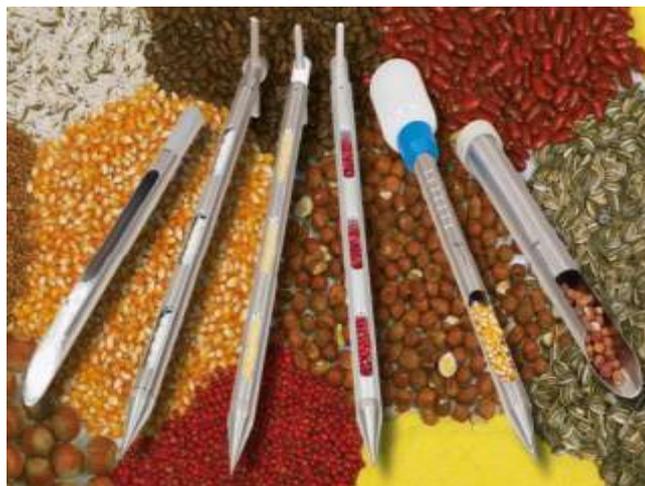
Образец сравнения – материал или вещество объекта аналитического контроля, достаточно однородное в отношении одной или нескольких надежно установленных характеристик, чтобы быть использованными при калибровке прибора, оценке метода измерений или приписывания значений этих характеристик материалам или веществам.

Однократное измерение – измерение, выполненное один раз.

Округление чисел – математическая операция, позволяющая уменьшить количество знаков в числе за счёт замены числа его приближённым значением с определённой точностью.

Остаточный член – разность между заданной функцией и функцией её аппроксимирующей. Тем самым оценка остаточного члена является оценкой точности рассматриваемой аппроксимации. Этот термин применяется, например, в формуле ряда Тейлора.

Отбор пробы (пробоотбор) – процедура отбора части вещества или материала (объекта) с целью формирования пробы для последующего определения его состава (структуры и (или) свойств).



Относительная погрешность – это отношению абсолютной погрешности или к истинному значению определяемой величины и, как правило, не имеет знака.

Отклонение – флуктуация, несовпадение, нарушение, отличие.

Относительное измерение – измерение отношения величины к одноимённой величине, играющей роль единицы, или измерение изменения величины по отношению к одноимённой величине, принимаемой за исходную.

Относительной погрешностью δx называют отношение абсолютной погрешности к истинному значению:

$$\delta x = \frac{\Delta x}{x^*}$$

II

Параметр – это обобщенное название определенного физического, геометрического или иного свойства, устройства или процесса.

Параллельные серии химического анализа – серия единичных определений, выполненных в условиях повторяемости.

Плотностью вероятности (плотностью распределения) $f(x)$ непрерывной случайной величины X называется производная ее функции распределения.

Повторяемость – характеризует минимальное возможное различие результатов независимых параллельных значений измерений.

Погрешность пробоотбора – разность между значениями величин, характеризующих состав и (или) свойства, и (или) структуру объекта и пробы.

Под истинным значением физической величины понимается значение, которое идеальным образом отражало бы в качественном и количественном отношениях соответствующую физическую величину.

Полуколичественный анализ – это метод, при котором результаты представляют собой дискретную последовательность величин, а степень дискретности величины сравнима с определенной величиной.

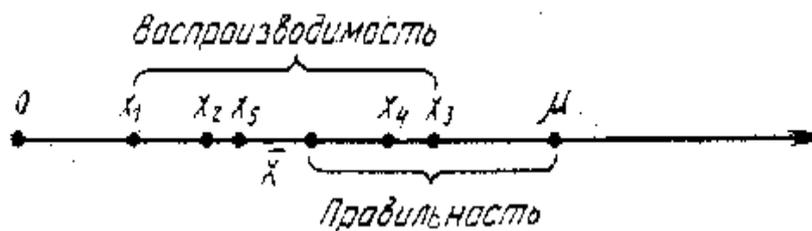
Полуэмпирические методы – содержат эмпирические коэффициенты, которые заменяют множество вычислений в «тяжелых» методах.

$$\begin{aligned}n \cdot \alpha + b \cdot \sum t + c \cdot \sum t^2 &= \sum y; \\ \alpha \cdot \sum t + b \cdot \sum t^2 + c \cdot \sum t^3 &= \sum y \cdot t; \\ \alpha \cdot \sum t^2 + b \cdot \sum t^3 + c \cdot \sum t^4 &= \sum y \cdot t^2;\end{aligned}$$

где α , b и c – эмпирические коэффициенты

Порядок – это показатель степени при концентрации данного вещества в кинетическом уравнении.

Правильность – степень близости среднего значения \bar{x} , полученного на основании большой серии результатов измерения, к принятому опорному значению (μ).



Правильность измерений – качество измерений, отображающее близость к нулю систематических погрешностей результатов измерений.

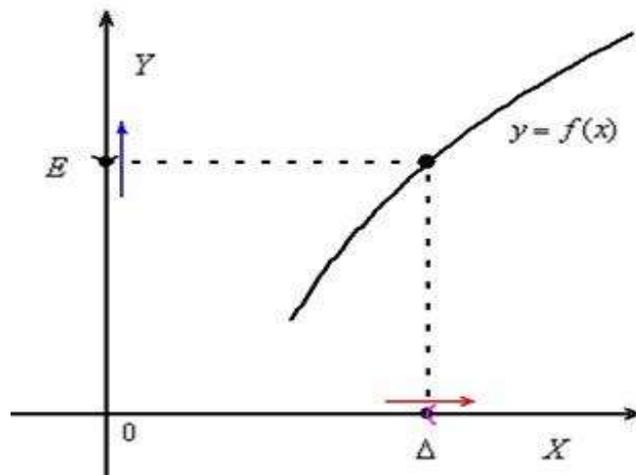
Предел воспроизводимости – допускаемое для принятой вероятности 95 % абсолютное расхождение между двумя результатами анализа, полученными в условиях воспроизводимой, принято обозначение R .

Предел повторяемости – допускаемое для принятой вероятности 95 % абсолютное расхождение между наибольшим и наименьшим значениями из n единичных определений аналита, полученных в условиях повторяемости; принято обозначение r_n .

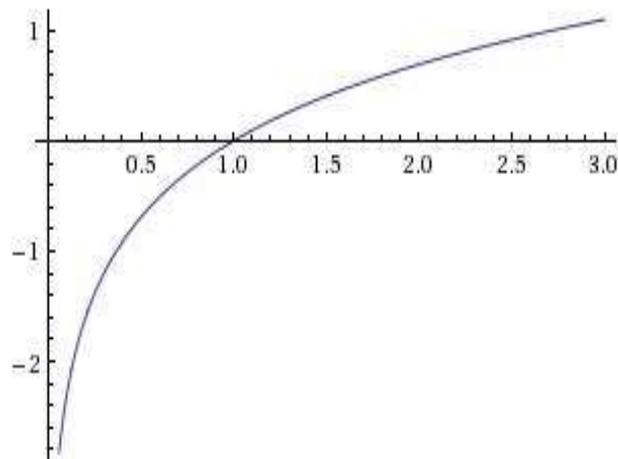
$$\frac{|X_1 - X_2|}{(X_1 + X_2)/2} \cdot 100\% \leq r$$

Предел обнаружения (C_{\min}) – это наименьшее содержание аналита, при котором он может быть обнаружен с помощью данной методики с заданной доверительной вероятностью.

Предел определения ($C_{\text{опр}}$) – это наименьшее содержание аналита, которое может быть количественно определено с помощью данной методики с установленными характеристиками погрешности (неопределенности).



Предел функции в заданной точке – такая величина, к которой стремится значение рассматриваемой функции при приближении её аргумента к данной точке.



Представительная проба – проба, состав и (или) свойства, и (или) структура которой принимается идентичной составу и (или) свойствам, и (или) структуре объекта, от которого она отобрана.

Прецизионность – степень близости друг к другу независимых результатов измерений, полученных в конкретных регламентированных условиях.

Приближенным числом X называется число, незначительно отличающееся от точного числа Y и заменяющее последнее в вычислениях.

Принцип анализа вещества (материала) – физическое явление или эффект, положенные в основу метода анализа.

Принцип измерений – физическое явление или эффект, положенный в основу измерений.

Принятое опорное значение – значение, которое служит в качестве согласованного для сравнения и получено как теоретическое или установленное значение, базирующееся на научных принципах.

Приписанная характеристика погрешности результата анализа – установленная характеристика погрешности любого результата анализа, полученного при соблюдении требований и правил данной методики анализа.

Проба – отобранная для анализа часть вещества или материала (объекта), отражающая его химический состав (структуру и (или) свойства). В зависимости от способа получения различают следующие виды проб: точечная, исходная, разовая, суточная, промежуточная, объединенная, сокращенная, лабораторная, аналитическая и другие. В зависимости от назначения различают пробы: контрольная, рабочая, резервная, арбитражная и другие.



Производная (функции в точке) – основное понятие дифференциального исчисления, характеризующее скорость изменения функции (в данной точке). Определяется как предел отношения приращения функции к приращению её аргумента при стремлении приращения аргумента к нулю, если такой предел существует. Функцию, имеющую конечную производную (в некоторой точке), называют дифференцируемой (в данной точке).

Промах – это погрешность, которая резко искажает результат анализа и обусловлена неисправностью измерительных приборов, неправильным отсчетом показаний, резким изменением условий при выполнении анализа, грубыми ошибками аналитика и так далее.

$$\frac{|X_i - X_j|}{R} \geq U_{p,N}$$

Прямые измерения – это измерения, при котором искомое значение физической величины получают непосредственно.

Р

Равноточные измерения – однотипные результаты, получаемые при измерениях одним и тем же инструментом или им подобным по точности прибором, одним и тем же (или аналогичным) методом и в тех же условиях.

Размах – разность между наибольшим и наименьшим значениями результатов наблюдений. Пусть X_1, \dots, X_n – взаимно независимые случайные величины с функцией распределения $F(x)$ и плотностью вероятности $f(x)$

$$R = X_{\max} - X_{\min}$$

Размерность физической величины – выражение, показывающее связь этой величины с основными величинами данной системы физических величин;

записывается в виде произведения степеней сомножителей, соответствующих основным величинам, в котором численные коэффициенты опущены.

Рангом матрицы называют количество линейно независимых столбцов матрицы (столбцовый ранг матрицы) или количество линейно независимых строк матрицы (строчный ранг матрицы).

Рандомизация – это процедуры случайного распределения участников эксперимента по группам или порядка предъявления им экспериментальных условий.



Распределение Стьюдента – (t-распределение) в теории вероятностей – это однопараметрическое семейство абсолютно непрерывных распределений. Названо в честь Уильяма Сили Госсета, который первым опубликовал работы, посвящённые этому распределению, под псевдонимом «Стьюдент».

Распределение Фишера в теории вероятностей — это двухпараметрическое семейство абсолютно непрерывных распределений.

Регрессионный анализ - это метод установления аналитического выражения стохастической зависимости между исследуемыми признаками. Уравнение

регрессии показывает, как в среднем изменяется y при изменении любого из x_i , и имеет вид:

$$y = f(x_1, x_2, \dots, x_n),$$

где y – зависимая переменная (она всегда одна);

x_i – независимые переменные (факторы) (их может быть несколько).

Если зависимая переменная одна – это простой регрессионный анализ. Если же их несколько ($n \geq 2$), то такой анализ называется многофакторным.

Результат аналитического контроля – заключение о соответствии или несоответствии объекта аналитического контроля установленным требованиям к его химическому составу, структуре, свойствам, представленное в виде документа.

Результат измерения – значение характеристики, полученное выполнением регламентированного метода измерений.

Результат холостого опыта – содержание аналита, полученное при проведении холостого опыта, используемое при вычислении результата анализа.

Релятивизация – проведение отдельных аналитических операций в идентичных и строго контролируемых условиях с тем чтобы возможные систематические погрешности взаимно скомпенсировать.

С

Синтез – процесс соединения или объединения ранее разрозненных вещей или понятий в целое.

Систематическая ошибка отбора – статистическое понятие, показывающее, что выводы, сделанные применительно к какой-либо группе, могут оказаться неточными вследствие неправильного отбора в эту группу.

Систематическая погрешность – разность между математическим ожиданием результата измерения и истинным значением.

Скорость химической реакции – это изменение концентрации вещества в единицу времени в единице объема. В общем случае скорость реакции меняется с течением времени и поэтому её лучше определять, как производную от концентрации реагирующего вещества по времени (при постоянном объеме системы).

Случайная погрешность – составляющая погрешности результата измерения, изменяющаяся случайным образом (по знаку и значению) при повторных измерениях, проведенных с одинаковой тщательностью, одной и той же физической величины.

Среднее арифметическое (в математике и статистике) множества чисел – сумма всех чисел, делённая на их количество. Является одной из наиболее распространённых мер центральной тенденции.

Среднее значение выборки – это сумма случайных величин в выборке, деленная на их число.

Стандартное отклонение – в теории вероятностей и статистике наиболее распространённый показатель рассеивания значений случайной величины относительно её математического ожидания. При ограниченных массивах выборок значений вместо математического ожидания используется среднее арифметическое совокупности выборок.

Статистика – отрасль знаний, наука, в которой излагаются общие вопросы сбора, измерения и анализа массовых статистических (количественных или качественных) данных; изучение количественной стороны массовых общественных явлений в числовой форме.

Статистический критерий – строгое математическое правило, по которому принимается или отвергается та или иная статистическая гипотеза с известным уровнем значимости.

Субъективные (операторные / личные погрешности) – погрешности, обусловленные степенью внимательности, сосредоточенности, подготовленности и другими качествами оператора.

Сходимость – существование конечного предела у числовой последовательности, суммы бесконечного ряда, значения у несобственного интеграла, значения у бесконечного произведения.

Т

Теорема Чебышева – при достаточно большом числе независимых испытаний можно с вероятностью, близкой к единице, утверждать, что разность между средним арифметическим наблюдавшихся значений случайной величины и математическим ожиданием этой величины по абсолютной величине окажется меньше сколь угодно малого числа при условии, что случайная величина имеет конечную дисперсию.

Теория вероятностей – раздел математики, изучающий случайные события, случайные величины, их свойства и операции над ними.

Термин – (лат. terminus – предел, граница) – слово или словосочетание,

обозначающее эмпирические или абстрактные объекты, значение которого уточняется в рамках научной теории.

Технические средства – материальная продукция характерной формы, состоящая из разрозненных частей.

Точность измерения – это степень приближения результатов измерения к некоторому действительному значению физической величины.

Точность результата измерений – одна из характеристик качества измерения, отражающая близость к нулю погрешности результата измерения.

Трансцендентное уравнение – это уравнение, не являющееся алгебраическим. Обычно это уравнения, содержащие показательные, логарифмические, тригонометрические функции.

У

Условие – категория философии, обозначающая отношение объекта к окружающей действительности, явлениям объективной реальности.

Ф

Фактор (лат. *factor* «делающий, производящий») – причина, движущая сила какого-либо процесса, определяющая его характер или отдельные его черты.

Физическая величина – одно из свойств физического объекта (физической системы, явления или процесса), общее в качественном отношении для многих физических объектов, но в количественном отношении индивидуальное для каждого

из них. Кроме названия каждая физическая величина имеет обозначение и единицы измерения.

Физико-химические методы анализа основаны на зависимости физических свойств вещества от его природы, причем аналитический сигнал представляет собой величину физического свойства, функционально связанную с концентрацией или массой определяемого компонента.

Флуктуация – (от лат. fluctuatio – колебание) – цикличное колебание, нестабильность; отклонение от состояния равновесия, от нормы, любое случайное отклонение какой-либо величины. В квантовой механике – отклонение от среднего значения случайной величины, характеризующей систему из большого числа хаотично взаимодействующих частиц; такие отклонения вызываются тепловым движением частиц или квантовомеханическими эффектами.

Функция – зависимость переменной y от переменной x , если каждому значению x соответствует единственное значение y .

Функция плотности вероятности – это относительная вероятность появления значений в выборке.

Х

Хемоинформатика – это применение методов информатики для решения химических проблем, пограничная область между химией и математикой.

Хеометрика – это раздел аналитической химии, ставящий целью получение химических данных с помощью математических методов обработки.

Химия – совокупность наук, предмет которых составляют соединения атомов

и превращения этих соединений, происходящие с разрывом одних и образованием других межатомных связей. Различные химии, науки отличаются тем, что они занимаются либо разными классами соединений (такое различие положено в основу разграничения неорганическая и органическая химия), либо разными типами реакций (радиохимия, радиационная химия, каталитический синтез, химия полимеров и так далее), либо разными методами исследования (физическая химия в ее различных направлениях). Отграничение одной химической науки от другой, сложившееся в процессе исторического развития химии и сохраняющееся по традиции, имеет относительное значение (философская энциклопедия)

– наука о веществах, их превращениях, взаимодействиях и о происходящих при этом явлениях.

– химия компьютерная (математическая химия) – сравнительно молодая область химии, основанная на применении компьютерных методов и дискретной математики.



Химический элемент – это совокупность атомов с одинаковым зарядом атомных ядер и одинаковым числом электронов в атомной оболочке. Атомное ядро состоит из протонов, число которых равно атомному номеру элемента, и нейтронов, число которых может быть различным. Каждый химический элемент имеет свои название и символ, которые приводятся в Периодической системе химических элементов.

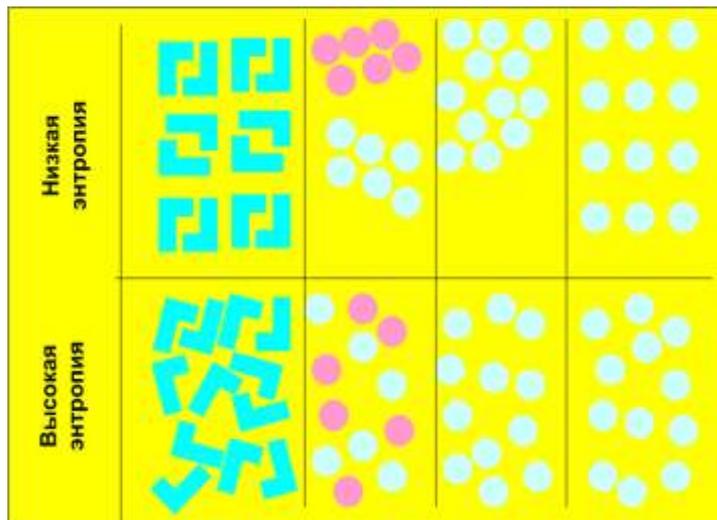
Экстраполяция, экстраполирование (от лат. *extrā* – вне, снаружи, за, кроме и лат. *polire* – приглаживаю, выправляю, изменяю, меняю) – особый тип аппроксимации, при котором функция приближенно определяется вне определенного интервала.

Эксперимент - (лат. *experimentum* – проба, опыт) – метод эмпирического познания, при помощи которого в контролируемых и управляемых условиях (зачастую специально конструируемых) получают знание относительно связей (чаще всего причинных) между явлениями и объектами или обнаруживают новые свойства объектов или явлений. Эксперименты могут быть натурными и мысленными. Натурный эксперимент проводится с объектами и в ситуациях самой изучаемой действительности и предполагает, как правило, вмешательство экспериментатора в естественный ход событий. Мысленный эксперимент предполагает задание условной ситуации, проявляющей интересующие исследователя свойства, и оперирование идеализированными объектами (последние зачастую специально конструируются для этих целей). Промежуточный статус носят модельные эксперименты, проводимые с искусственно созданными моделями (которым могут соответствовать, а могут и не соответствовать какие-либо реальные объекты и ситуации), но которые предполагают реальное изменение этих моделей.

Эмпирические коэффициенты – параметры эмпирической формулы, численные значения которой подбираются исследователем в целях наиболее точного соответствия результатов расчета эмпирическим данным.

Эмпирические формулы – это формулы, которые используются для аналитического представления опытных данных.

Энтропия – это мера беспорядка (неупорядоченности) в некоторой системе.



2 Вопросы для самостоятельной работы

2.1 Вопросы к первому рубежному контролю

Объяснить смысл следующих терминов:

1 абсолютная погрешность вычисления функции;

2 абсолютная погрешность измерения;

3 алгебраическое уравнение;

4 вероятность;

5 воспроизводимость;

6 вычислительная химия;

7 генеральная выборка;

8 гистограмма;

9 диаграмма;

10 дисперсия;

11 доверительная вероятность;

12 доверительный интервал;

12 измерение;

14 истинное значение величины X ;

15 косвенные измерения;

16 линейное уравнение;

17 математическое ожидание;

18 матрица;

19 наименьшее число значащих цифр;

20 независимые измерения;

21 область значений вероятности;

22 округление чисел;

23 относительная погрешность измерений;

24 погрешность единичного измерения;

25 правильность измерения;

- 26 промах;
- 27 прямые измерения;
- 28 размах значений;
- 29 ранг матрицы;
- 30 систематические ошибки;
- 31 случайные ошибки;
- 32 среднее арифметическое значение;
- 33 стандартное отклонение;
- 34 статистика;
- 35 сумма абсолютных погрешностей слагаемых;
- 36 сходимость измерений;
- 37 точность;
- 38 трансцендентное уравнение;
- 39 хемометрика;
- 40 центральная предельная теорема Чебышева;

2.2 Вопросы ко второму рубежному контролю

Объяснить смысл следующих терминов:

- 1 абсолютные (закрепленные) ячейки в Excel;
- 2 аппроксимация;
- 3 асимметрия гистограммы;
- 4 градуировочный график;
- 5 значимое различие;
- 6 интерполяция;
- 7 качественный анализ;
- 8 количественный анализ;
- 9 корреляция независимых данных;

- 10 корреляция, виды корреляции;
- 11 коэффициент корреляции;
- 12 коэффициенты прямой и обратной корреляции;
- 13 линии тренда;
- 14 математическое ожидание;
- 15 медиана (M_e) в гистограмме;
- 16 мода (M_o) в статистике;
- 17 назначение интервалов;
- 18 определение по гистограмме среднего значения, дисперсии и стандартного отклонения;
- 19 оптимальное число измерений в общем случае;
- 20 относительные ячейки в Excel;
- 21 параллельные измерения;
- 22 параметры линии тренда;
- 23 параметры, определяемые по таблицам Стьюдента;
- 24 параметры, определяемые по таблицам Фишера;
- 25 плотность вероятности измерений;
- 26 полуколичественный анализ;
- 27 рабочий диапазон измерений;
- 28 распределение Гаусса;
- 29 регрессионный анализ;
- 30 регрессия;
- 31 спарклайны в Excel;
- 32 способ выбора интервалов;
- 33 способы суммирования в среде Excel;
- 34 сущность метода Гаусса;
- 35 сущность метода Крамера;
- 36 сущность метода наименьших квадратов;
- 37 упорядочивание данных в среде Excel;
- 38 чувствительность метода;

39 экстраполяция;

40 электронные таблицы Excel, структура экрана.

Список использованных источников

- 1 Налимов, В. В. Применение математической статистики при анализе вещества : книга / В. В. Налимов. – Государственное издательство физико-математической литературы. – Москва, 1960. – 432 с.
- 2 Дёрфель, К. Статистика в аналитической химии / Перевод с немецкого И. С. Шаплыгина ; Под ред. В. В. Налимова. – Москва : Мир, 1969. – 247 с.
- 3 Большая Российская энциклопедия. – М. : Научное издательство, «Большая Российская энциклопедия», 2005.
- 4 Зефирова, Н. С. Химическая энциклопедия / Н. С. Зефирова. – М. : Большая Российская энциклопедия. – 1995. – Т. 4. – 639 с.
- 5 Конт-Спонвиль, А. Философский словарь / А. Конт-Спонвиль. – М. : Литрес, 2015 – 670 с.
- 6 Закс, Л. Статистическое оценивание / Л. Закс. – М.: Статистика, 1976. – 598 с.
- 7 Чарыков А. К. Математическая обработка результатов химического анализа : учеб. пособие для вузов / А. К. Чарыков. – Л. : Химия, 1984. – 168 с.
- 8 Химия: справочные материалы: книга для учащихся / Ю. Д. Третьяков, Н. Н. Олейников, Я. А Кеспер, И. В. Казимирчик. – М. : Просвещение, 1989. – 224 с. – ISBN: 5-09-002946-6.
- 9 Брокгауз, Ф. А. Энциклопедический словарь / Ф. А. Брокгауз, И. А. Ефрон. – М. : Издательство «Русское слово», 1996. – 5547 с.
- 10 Стряпков, А. В. Математическая обработка результатов химического эксперимента : учеб. пособие для вузов / А. В. Стряпков, В. А. Минаева, Т. А. Григоренко. – Оренбург. : ОГУ, 2005. – 166 с. – ISBN 5-7410-0550-0.
- 11 Каньгина, О. Н. Физические методы исследования : учеб. пособие / О. Н. Каньгина, А. Г. Четверикова, В. Л. Бердинский. – Оренбург. : ОГУ, 2015. – 142 с. – ISBN 978-5-7410-1222-2.

12 Каныгина, О. Н. Глоссарий для самостоятельной работы [Электронный ресурс] : методические указания / О. Н. Каныгина, Л. Н. Гусловская. – Электрон. текстовые дан. (1 файл: 962 Кб). - Оренбург : ОГУ, 2017. - Загл. с тит. экрана. -Adobe Acrobat Reader 6.0

13 Демина, Т. Я. Основы кристаллографии : учеб. пособие / Т. Я. Демина, Н. И. Шефер. – Оренбург. : ОГУ, 2005. – 235 с. – ISBN 5-7410-0399-1.

14 Химия и жизнь : ежемес. журн. / учредитель : АНО Центр «НаукаПресс». – М. : Наука, 2013.

15 Успехи химии: ежемес. журн./ учредитель: Рос.акад.наук и Ин-т. орг. химии им. Зелинского . – 1932 . – . – М. : РАН

16 Прохоров, В. Ю. Вероятность и математическая статистика: Энциклопедия / Гл. ред. Ю. В. Прохоров. - М.: Большая Российская энциклопедия, 1999. – 910 с. – ISBN 5-85270-265-X